

SIMULACION DE PROCESOS DE SEPARACION POR MODELOS
DE ORDEN REDUCIDO - PARTE II: SISTEMAS NO IDEALES
CON DOS FASES LIQUIDAS

Ernesto C. Martínez

Ramón L. Cerro

INGAR-Instituto de Desarrollo y Diseño
Avellaneda 3657
3000 - Santa Fe - Argentina

RESUMEN

Un modelo de parámetros distribuidos para una columna de destilación con dos fases líquidas se formula, a partir del cual una técnica de reducción es propuesta. Otra técnica basada en aproximación polinomial directa es también dada para la obtención de un modelo reducido en este tipo de sistemas de proceso. Importantes aspectos de los modelos reducidos se muestran a través de desarrollos analíticos y análisis numérico.

ABSTRACT

A distributed parameter model for a two liquid phases distillation column is formulated, from it a reduced order technics is given. Another technics based on direct polynomial approximation is proposed to get a reduced model for this kind of process systems. Important aspects of reduced models are shown through analytical developments and numerical analysis.

1. INTRODUCCION

Durante la síntesis y diseño de procesos de destilación de sistemas que, por sus características no-ideales, pueden presentar una segunda fase líquida es indispensable conocer bajo qué condiciones un sistema trifásico aparece. No obstante, una escasa literatura ha sido dedicada a la simulación de torres de destilación con dos fases líquidas, más aún, la mayor parte de los trabajos previos han sido dedicados a simulaciones de estado estacionario. Un modelo riguroso de simulación de columna con dos fases líquidas ha sido presentado por Block y Hegner [1].

En aquel trabajo un esquema iterativo que utiliza la técnica de Newton-Raphson para resolver las formas linealizadas de los balances de componentes de una manera análoga a la conocida técnica de Naphtali-Saldholm [2], es propuesto. Métodos alternativos que siguen la misma metodología, se proponen en [3] y [4]. La principal desventaja que presentan estas metodologías, como se ha notado en [5], es que toman la eficiencia como 100%, y precisamente una de las causales de la aparición de una segunda fase líquida es la disminución de la eficiencia.

Un nuevo método que permite incluir información sobre la eficiencia ha sido propuesto en [5]. El método utiliza dos lazos de iteración, uno externo y otro interno que utilizan modelos con distinta rigurosidad.

En este trabajo se presenta una forma de simulación dinámica y estacionaria de sistemas con dos fases líquidas usando esquemas reducidos. Partiendo del modelo dinámico riguroso del sistema un modelo de parámetro distribuido es formulado, y a partir de éste un esquema de reducción se propone basado en interpolación polinomial. El mismo esquema reducido se obtiene a través de un método de reducción por aproximación polinomial directa ya propuesto en la parte I.

2. DESARROLLO DE ECUACIONES

Modelo riguroso

Vamos a desarrollar aquí las ecuaciones que rigurosamente (plato-a-plato) describen el comportamiento de una columna con dos fases líquidas, sin alimentaciones (ni extracciones) de Corrientes másicas o energéticas. En la presentación que sigue, supondremos que:

- i) Las dos fases líquidas, cuando coexistan, estarán en equilibrio y perfectamente mezcladas.
- ii) Las dos fases líquidas y el vapor que abandona un plato cualquiera, están a la misma temperatura.
- iii) Existe una relación definida (no necesariamente de equilibrio) entre las composiciones de las dos fases líquidas y del vapor que abandonan cada plato.
- iv) El holdup de vapor en cada plato es despreciable.

El modelo dinámico para este sistema con dos fases líquidas se obtiene escribiendo las balances de masa y energía de estado no estacionario, alrededor del j -ésimo plato, junto a las relaciones de equilibrio

e hidráulica. Las variables asociadas al plato j se muestran en la fig.

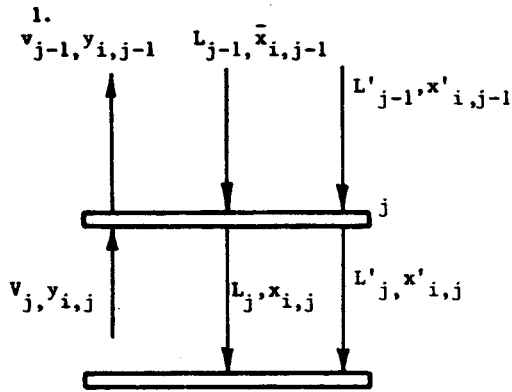


fig.1

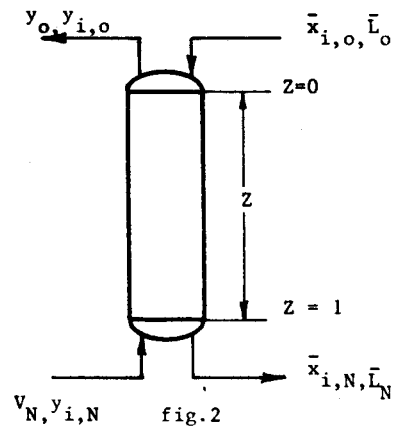


fig.2

El balance de componente alrededor de la etapa j -ésima es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (M_j x_{i,j} + M'_j x'_{ij}) &= L_{j-1} x_{i,j-1} + L'_{j-1} x'_{i,j-1} + \\ &+ V_j y_{ij} - L_j x_{ij} - L'_j x'_{ij} - V_{j-1} y_{i,j-1} \end{aligned} \quad (2.1)$$

$i = 1, \dots, C ; j = 1, \dots, N$

Donde N es el número de etapas y C el de componentes. El balance de materia total es:

$$\frac{d}{dt} (M_j + M'_j) = L_{j-1} + L'_{j-1} + V_j - L_j + L'_j - V_{j-1} \quad (2.2)$$

y el balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (M_j h_j + M'_j h'_j) &= (L_{j-1} h_{j-1} + L'_{j-1} h'_{j-1} + V_j H_j \\ &- L_j h_j - L'_j h'_j - V_{j-1} H_{j-1}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde:

$$H_j = \sum_{i=1}^C y_{ij} H_{ij} ; h_j = \sum_{i=1}^C x_{ij} h_{ij}$$

$$h'_j = \sum_{i=1}^C x'_{ij} h'_{ij} \quad (2.4)$$

Las relaciones algebraicas que completan la descripción son:

- ecuación hidráulica:

$$M_j + M'_j = f(L_j, L'_j) \quad (2.5)$$

- las relaciones líquido-vapor:

$$y_{i,j-1} = y(x_{ij}, T_j) \quad (2.6.a)$$

$$y_{i,j-1} = y(x'_{i,j}, T_j) \quad (2.6.b)$$

- relación para el "punto de burbuja":

$$\sum_{i=1}^C y(x_{ij}, T_j^L) = 1 \quad (2.7.a)$$

$$\sum_{i=1}^C y(x'_{ij}, T_j^L) = 1 \quad (2.7.b)$$

- eficiencia de vaporización:

$$y_{i,j-1} = E_{ij}^V k_{ij} x_{ij} = E_{ij}^V k'_{ij} x'_{ij} \quad (2.8)$$

- equilibrio líquido-líquido:

$$\gamma_{ij} x_{ij} = \gamma'_{ij} x'_{ij} \quad (2.9)$$

donde γ_{ij} y γ'_{ij} son los coeficientes de actividad.

Introducimos un nuevo conjunto de variables:

$$\bar{M}_j = M_j + M'_j \quad (2.10.a)$$

$$\bar{L}_j = L_j + L'_j \quad (2.10.b)$$

$$\bar{x}_{ij} = (L_j x_{ij} + L'_j x'_{ij}) / \bar{L} \quad (2.10.c)$$

$$\bar{x}'_{ij} = (M_j x_{ij} + M'_j x'_{ij}) / \bar{M} \quad (2.10.d)$$

$$\bar{h}_{ij} = (L_j h_{i,j} + L'_j h'_{i,j}) / \bar{L} \quad (2.10.e)$$

$$\bar{h}'_{i,j} = (M_j h_{i,j} + M'_j h'_{i,j}) / \bar{M} \quad (2.10.f)$$

de (2.10.c) ó (2.10.d) puede definirse un parámetro η que describe el número de fases en el interior de la columna:

$$\bar{x}_{i,j} = \eta_j x_{ij} + (1-\eta_j) x'_{ij}$$

$$0 \leq \eta_j \leq 1$$

Si $\eta_j = 0$ ó $\eta_j = 1$ solo una fase líquida estará presente.

Usando las nuevas variables, el modelo riguroso queda:

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{x}_{ij}) = (\bar{L} \bar{x}_i - v y_i)_{j-1} - (\bar{L} \bar{x}_i - v y_i)_j \quad (2.11)$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j) = (\bar{L} - V)_{j-1} - (\bar{L} - V)_j \quad (2.12)$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{h}_{ij}) = (\bar{L}_{j-1} \bar{h}_{j-1} - v_{j-1} H_{j-1}) - (*) \quad (2.13)$$

$$(*) = (\bar{L}_j \bar{h}_j - V_j H_j)$$

que se completa con las relaciones algebraicas:

- ecuación hidráulica:

$$\bar{M}_j = m (\bar{L}_j) \quad (2.14)$$

- relación líquido-vapor (véase Apéndice I):

$$y_{i,j-1} = \Psi (\bar{x}_{i,j}, T_{j-1}^L) \quad (2.15)$$

- relación para el punto de burbuja:

$$\sum_{i=1}^C y_{i,j-1} (\bar{x}_{ij}, T_j^L) = 0, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.16)$$

Modelo de parámetro distribuido

Siguiendo el procedimiento dado en [8] vamos a generar un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que modelan la columna con dos fases líquidas como un sistema distribuido. Asumimos que las variables \bar{x}_i , y_i , \bar{L} , V , M y T son funciones continuas de la variable adimensional Z . Usando esta suposición podemos escribir:

$$\bar{x}_{i,j-1} = \bar{x}_{ij} - \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial Z} \Delta Z \quad (2.17)$$

donde ΔZ es el espaciado entre platos. Por conveniencia vamos a tomar $\Delta Z = 1/N$. Los ecuaciones diferenciales parciales y algebraicas que describen el sistema son:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{M} \bar{x}_i) = \frac{\partial}{\partial Z} (V y_i - \bar{L} \bar{x}_i) \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \bar{M}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} (V - \bar{L}) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{M} \bar{h}) = \frac{\partial}{\partial Z} (V H - \bar{L} \bar{h}) \quad (2.20)$$

$$\bar{M} \Delta Z = \bar{M} (\bar{L}) \quad (2.21)$$

$$y_i - \Delta Z \frac{\partial y_i}{\partial Z} = y (\bar{x}_i, T^L) \quad (2.22)$$

$$\sum_{i=1}^C y (\bar{x}_i, T^L) = 1 \quad (2.23)$$

donde:

$$\bar{M} = \bar{M}_j / \Delta Z \quad (2.24)$$

puede considerarse como el holdup de líquido por unidad de longitud. Las condiciones de contorno para las ecuaciones anteriores se obtienen considerando las condiciones en el tope y la base de la columna de la fig.2.

$$\bar{x}_1 (Z = 0) = x_{i0}, \quad y_i (Z = 1) = y_{i,n}$$

$$\begin{aligned}\bar{L}(Z=0) &= \bar{L}_0, & V(Z=1) &= V_N \\ T^{\bar{L}}(Z=0) &= T_0, & T^V(Z=1) &= T_N^V\end{aligned}\quad (2.25)$$

Las ecuaciones (2.18) y (2.20) pueden simplificarse usando (2.19) para dar:

$$\bar{M} \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} (V y_i - \bar{L} \bar{x}_i) - \bar{x}_i \frac{\partial}{\partial Z} (V - \bar{L}) \quad (2.26)$$

$$\bar{M} \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} (V \bar{h} - \bar{L} \bar{h}) - \bar{h} \frac{\partial}{\partial Z} (V - \bar{L}) \quad (2.27)$$

Si ahora las funciones \bar{x}_i , y_i , etc. son expandidas en términos de los polinomios de Lagrange:

$$\bar{x}_i(Z, t) = \sum_{k=1}^{n+2} L_k(Z) \bar{x}_{ik}(t) \quad (2.28)$$

Sustituyendo:

$$\bar{M}_j \frac{d\bar{x}_{ij}}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k y_{ik} - \bar{L}_k \bar{x}_{ik}) - \bar{x}_{ij} \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k - \bar{L}_k) \quad (2.29)$$

$$\frac{d(\bar{M}_j)}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k - \bar{L}_k) \quad (2.30)$$

$$\bar{M}_j \frac{d\bar{h}_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k \bar{h}_k - \bar{L}_k \bar{h}_k) - \bar{h}_j \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k - \bar{L}_k) \quad (2.31)$$

$$\bar{M}_j \Delta Z = n (\bar{L}_j) \quad (2.32)$$

donde:

$$j = 2, \dots, n+2$$

$$A_{jk} = L_k(Z_j - \Delta Z) - L_k(Z_j) \quad (2.33)$$

la representación se completa con:

$$y_{ij} - \Delta Z \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} y_{ik} = y(\bar{x}_{i,j}, T_j^{\bar{L}}) \quad (2.34)$$

$$j = 1, \dots, n+1$$

$$y: \quad \sum_{i=1}^C y(\bar{x}_i, T^{\bar{L}}) = 1, \quad 0 \leq Z \leq 1 \quad (2.35)$$

las condiciones de contorno son:

$$\begin{aligned}\bar{x}_{i1} &= \bar{x}_{i0}, & y_{i,n+2} &= y_{iN} \\ \bar{L}_1 &= \bar{L}_0, & V_{n+2} &= V_N \\ T_1^{\bar{L}} &= T_0^{\bar{L}}, & T_{n+2}^V &= T_N^V\end{aligned}\quad (2.36)$$

Como se muestra en el apéndice II el balance de energía dado por (2.31) puede reducirse a una expresión algebraica.

Reduccion directa

El paso intermedio de la formulación del sistema de ecuaciones diferenciales parciales (2.17) - (2.23) tiene gran importancia analítica y conceptual, pero con fines prácticos puede ser omitido si asumimos simplemente (Parte I) que \bar{x}_i , y_i , \bar{L} , V , etc. son variables continuas a lo largo de la columna y si con esta aproximación suponemos que (2.11) (2.16) se cumplen solo en n puntos Z_i arbitrariamente elegidos en el interior de la columna. Si elegimos $n < N$ se obtiene el modelo reducido:

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (\bar{L} - v) \quad (2.37)$$

$$\bar{M}_j \frac{d\bar{x}_{ij}}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{x}_{ik} - v_k y_{ik} - \bar{x}_{ij} (\bar{L}_k - v_k)] \quad (2.38)$$

$$\bar{M}_j \frac{d\bar{h}_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{h}_k - v_k H_k - \bar{h}_j (\bar{L}_k - v_k)] \quad (2.39)$$

$$\bar{M}_j = m (\bar{L}_j) \quad , \quad j = 2, \dots, n+2 \quad (2.40)$$

$$y_{ij} = \psi \left[\sum_{k=1}^{n+2} L_k (Z_j + \Delta Z) \bar{x}_{ik} , T_{z_j} + \Delta Z \right] \quad (2.41)$$

$j = 1, 2, \dots, n+1$

$$\sum_{i=1}^C y (\bar{x}_i(Z), T(Z)) = 1 , \quad 0 \leq Z \leq 1 \quad (2.42)$$

Con las condiciones de contorno son aquí también (2.36).

3. EFECTO DE LA ALIMENTACION

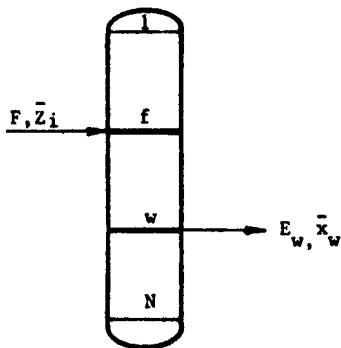


fig.3

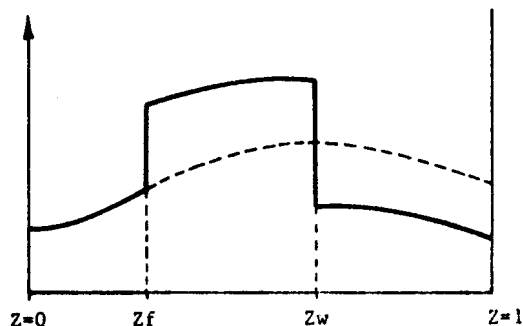


fig.4

Consideremos una columna con dos fases líquidas de la fig. 3 donde una corriente totalmente líquida es alimentada en el plato f y una corriente líquida se extrae en el plato w . En la fig. 4 se aprecia la discontinuidad introducida en el perfil de \bar{L} debido al ingreso de la corriente de composición global \bar{Z} . Esta discontinuidad resulta una severa dificultad en la metodología de aproximación polinomial, por tanto la redefinición de variables [11], será usada también en este caso para remediar el problema.

Las ecuaciones para el modelo riguroso que describen la columna son:

- Balance de materia total

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = (\bar{L}_{j-1} - v_{j-1}) - (\bar{L}_j - v_j), \quad j \neq f \text{ o } w \quad (3.1)$$

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = (\bar{L}_{j-1} - v_{j-1}) - (\bar{L}_j - v_j - F), \quad j = f \quad (3.2)$$

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = (\bar{L}_{j-1} - v_{j-1}) - (\bar{L}_j - v_j + w), \quad j = w \quad (3.3)$$

- Balance de componente

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{x}_{ij}) = (\bar{L}_{j-1} \bar{x}_{i,j-1} - v_{j-1} y_{ij-1}) - (\bar{L}_j \bar{x}_{ij} - v_j y_{ij}) \quad (3.4)$$

$j \neq f \text{ o } w$

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{x}_{ij}) = (\bar{L}_{j-1} \bar{x}_{i,j-1} - v_{j-1} y_{i,j-1}) - (\bar{L}_j \bar{x}_{ij} - v_j y_{ij} - F \bar{Z}_i), \quad j = f \quad (3.5)$$

- Balance de Energía

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{h}_j) = (\bar{L}_{j-1} \bar{h}_{j-1} - v_{j-1} H_{j-1}) - (\bar{L}_j \bar{h}_j - v_j H_j) \quad (3.6)$$

$j \neq f \text{ o } w$

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{h}_j) = (\bar{L}_{j-1} \bar{h}_{j-1} - v_{j-1} H_{j-1}) - (\bar{L}_j \bar{h}_j - v_j H_j - F E_f) \quad (3.7)$$

$j = f$

$$\frac{d}{dt} (\bar{M}_j \bar{h}_j) = (\bar{L}_{j-1} \bar{h}_{j-1} - v_{j-1} H_{j-1}) - (\bar{L}_j \bar{h}_j - v_j H_j + w E_w) \quad (3.7)$$

$j = w$

siendo E_f la entalpía por mol de alimentación y E_w está dado por:

$$E_w = \sum_{i=1}^C \bar{h}_{iw} \bar{x}_{iw} \quad (3.8)$$

La forma de tratar el ingreso o extracción de corrientes másicas o energéticas (siguiendo a Cho et.al [8]) consiste en definir una variable que es continua a lo largo de la columna. Así por ejemplo si defini

mos ξ como:

$$\xi = \begin{cases} \bar{L}_j - V_j & , \text{ para } j = 1, 2, \dots, f-1 \\ \bar{L}_j - V_j - F & , \text{ para } j = f, \dots, W-1 \\ \bar{L}_j - V_j - F + W & , \text{ para } j = w, \dots, N \end{cases} \quad (3.9)$$

las ecuaciones 3.1, 3.2 y 3.3 podrían escribirse como:

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = \xi_{j-1} - \xi_j \quad (3.10)$$

y utilizando la aproximación polinomial para ξ (que es una variable continua):

$$\frac{d\bar{M}_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} \xi_k(t) \quad j = 2, \dots, n+2 \quad (3.11)$$

Si llamamos 1 hasta n1 a todos los puntos de colocación por encima de la alimentación, n1+1 a n2 a aquellos que se encuentran por encima de la extracción y por debajo de la alimentación, y sean n2+1 los puntos de colocación por debajo de la extracción, la ecuación 3.11 se escribe como:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{M}_j}{dt} = & \sum_{k=1}^{n+1} A_{jk} (\bar{L}_k - V_k) + \sum_{k=n1+1}^{n2} A_{jk} (\bar{L}_k - V_k - F) + \\ & \sum_{k=n2+1}^{n+2} A_{jk} (\bar{L}_k - V_k - F + w) \end{aligned} \quad (3.12)$$

$j = 2, \dots, n+2$

en forma similar los balances de componentes y energía se escriben:

$$\begin{aligned} \bar{M}_j \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt} = & \sum_{k=1}^{n1} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{x}_{ik} - V_k y_{ik} - \bar{x}_{i,j} (\bar{L}_k - V_k)] + \\ & \sum_{k=n2+1}^{n+2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{x}_{ik} - V_k y_{ik} - F Z_i] \\ & - \bar{x}_{i,j} (\bar{L}_k - V_k - F) + \sum_{k=n2+1}^{n+2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{x}_{ik} - V_k y_{ik} - F Z_i] \\ & + w x_{iw} + \bar{x}_{i,j} (\bar{L}_k - V_k - F + w) \end{aligned} \quad (3.13)$$

$j = 2, \dots, n+2$

$$\begin{aligned} \bar{M}_j \frac{d\bar{h}_j}{dt} = & \sum_{k=1}^{n+1} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{h}_k - V_k H_k - \bar{h}_j (\bar{L}_k - V_k)] + \\ & + \sum_{k=n1+1}^{n2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{h}_k - V_k H_k - F E_f - \bar{h}_j (\bar{L}_k - V_k - F)] + \end{aligned}$$

$$\sum_{k=n2+1}^{n+2} A_{jk} [\bar{L}_k \bar{h}_k - V_k H_k - F E_f + W E_w - \bar{h}_j (\bar{L}_k - V_k - F + w)] \quad j = 2, \dots, n+2$$

La descripción se completa con (2.40), (2.41), (2.42).

4. EJEMPLO

El sistema bajo estudio será el compuesto por etanol-agua-butanol, las condiciones para el ejemplo se dan en la tabla I. La simulación de estado estacionario por método riguroso para este tipo de sistemas ha sido reportado en [5], donde además se detallan las propiedades físico-químicas utilizadas.

Tabla I. Condiciones del ejemplo

Nº de etapas	12 (incluye condensador y rehervidor)
Nº de Componentes	3
presión de operación	1,013 bars
Fracciones molares de la alimentación líquida:	
etanol	0.22
agua	0.75
butanol	0.03
Caudal de alimentación:	50 mol/hr
Caudal de reflujo	87 mol/hr
relación de reflujo	3
Entalpía de la alimentación	0.357073×10^6 Joule/hr
Caudal de extracción en la base	36 moles/hr

En la fig. 5 se muestran los perfiles rigurosos y reducidos. El modelo reducido ha sido obtenido usando 3 puntos de colocación y $\alpha = \beta = 1$ para los polinomios de Jacobi.

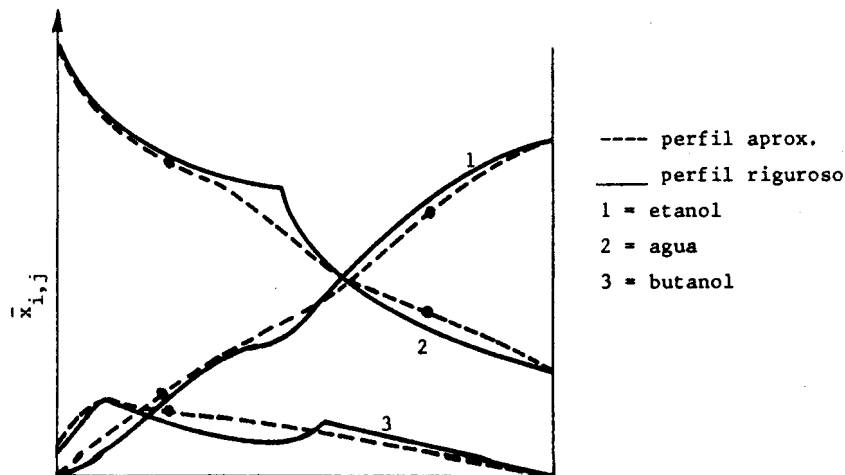


fig. 5

Estudios de optimalidad para este tipo de sistemas con dos fases líquidas están aun bajo estudio y serán reportados en futuras publicaciones. Los estudios dinámicos han sido realizados con C.S.M.P., en la fig. 6 se comparan los perfiles aproximado y riguroso del comportamiento de la composición promedio de la fase líquida del fondo de la columna cuando una entrada en escalón se produce en el caudal de alimentación. La tabla II contiene información sobre los tiempos de C.P.U. para este ejemplo, que dejan ver la considerable disminución que se produce por uso de los modelos reducidos.

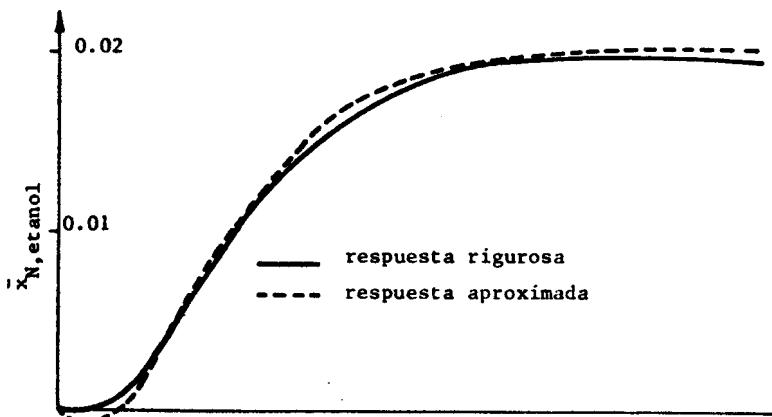


fig.6

Tabla II. Comparación de tiempos de CPU para ejemplo

Modelo de Simulación + perturbación de entrada	riguroso	reducido
1. cambio en el caudal de líquido	2 mol/min	2 mol/min
2. tiempo de CPU para alcanzar el estado estacionario	34 sec.	9 sec.

5. CONCLUSIONES

A pesar de la gran importancia práctica que los procesos de separación con dos fases líquidas poseen solo una escasa literatura referida a la simulación de tales sistemas, existe. En aplicaciones tales síntesis, diseño y control de este tipo de sistemas, donde múltiples simulaciones son requeridas, la metodología propuesta se ha mostrado particularmente útil [8].

Mejoras en el esquema de colocación y las funciones de interpolación podrían elevar la performance de la metodología, aunque desarrollos analíticos deberían mostrar las limitaciones impuestas por la reducción de información. Así, el trabajo pretende ser una introducción a la aplicación de metodologías reducidas en simulación de procesos de separación con dos fases líquidas.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Block, U. y Hegner, B., "Development and application of a simulation Model for three-phase distillation", AICHE J, Vol 22, N° 3, 1976, pags. 582-589.

- [2] Naphtali, L. y Sandholm D., "Multicomponent separation calculations by linearization", AICHE J., Vol 17, 1971, pag. 148.
- [3] Boston, J. Fournier R., "A quasi-Newton algorithm for solving multiphase equilibrium flash problems", trabajo presentado en 71^o Congreso anual de AICHE en Miami, 1978.
- [4] Boston, J. y Shah V. "An algorithm for rigorous distillation calculations with liquid phases", trabajo presentado al 86^o congreso nacional de AICHE, Houston, 1979.
- [5] Ross, B. y Seider W., "Simulation of three-phase Distillation Towers", Comp.&Chem.Eng. Vol 5, 1980, pags. 7-20.
- [6] Cho, Y. y Joseph, B., "Reduced-order steady-state and Dynamic models for separation processes", AICHE J., Vol 29, 1983, pags. 261-276.
- [7] Cho, Y. y Joseph, B., "Reduced-order models for separation columns, part III", comp & Chem. Eng., Vol 8, 1984, pags. 81-90.
- [8] Martínez, E. Tesis doctoral (en preparación), 1985.

Apéndice I: ecuación 2.15

partiendo de (2.10.g) y (2.9):

$$\bar{x}_{ij} = \eta_j x_{ij} + (1-\eta_j) \frac{Y_{ij}}{Y_{ij}} x_{ij} \quad (I.1)$$

$$\bar{x}_{ij} = x_{ij} \left[\eta_j + (1-\eta_j) \frac{Y_{ij}}{Y_{ij}} \right] \quad (I.2)$$

reemplazando en (2.6.a)

$$y_{i,j-1} = y \left(\frac{\bar{x}_{i,j}}{\left[\eta_j + (1-\eta_j) \frac{Y_{ij}}{Y_{ij}} \right]}, T_j^L \right) \quad (I.3)$$

$$y_{i,j-1} = \psi(\bar{x}_{i,j}, T_j^L) \quad (I.4)$$

Apéndice II: forma algebraica de la ecuación de energía

La ecuación de balance de energía en el punto de colocación Z está dada por (2.31):

$$\bar{M}_j \frac{dh_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k H_k - \bar{L}_k \bar{h}_k) - \bar{h}_j \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k - \bar{L}_k) \quad (II.1)$$

pero $\bar{h}_j = \bar{h}_j(T_j, \bar{x}_{j1}, \bar{x}_{j2}, \dots, \bar{x}_{jc})$ y por tanto aplicando la regla de la cadena:

$$\frac{d\bar{h}_j}{dt} = \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial T} \frac{dT_j}{dt} + \sum_{i=1}^c \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial x_{ij}} \frac{dx_{ij}}{dt} \quad (II.2)$$

donde C es el número de componentes. Usando la relación para el punto de burbuja, ec.(2.8) y ec.(I.2):

$$0 = \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^C \bar{K}_{i,j} \bar{x}_{i,j} \right) = \sum_{i=1}^C \left[\bar{x}_{i,j} \frac{d\bar{K}_{i,j}}{dt} + \bar{K}_{i,j} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt} \right] \quad (II.3)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C \left[\bar{x}_{i,j} \frac{\partial \bar{K}_{i,j}}{\partial T} \frac{dT_j}{dt} + \bar{K}_{i,j} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt} \right]$$

donde:

$$\bar{K}_{i,j} = \frac{E_{i,j} K_{i,j}}{\eta_j + (1-\eta_j)} \frac{\gamma_{i,j}}{\gamma_{i,j}} \quad (II.5)$$

despejando $\frac{dT_j}{dt}$ de (II.4):

$$\frac{dT_j}{dt} = - \frac{\sum_{i=1}^C \bar{K}_{i,j} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt}}{\sum_{i=1}^C \bar{x}_{i,j} \frac{\partial \bar{K}_{i,j}}{\partial T}} \quad (II.6)$$

y reemplazando en (II.2):

$$\frac{d\bar{h}_j}{dt} = - \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial T} \frac{\sum_{i=1}^C \bar{K}_{i,j} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt}}{\sum_{i=1}^C \bar{x}_{i,j} \frac{\partial \bar{K}_{i,j}}{\partial T}} + \sum_{i=1}^C \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial \bar{x}_{i,j}} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt} \quad (II.7)$$

A partir de (2.29):

$$\bar{M} \frac{d\bar{x}_{i,j}}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k y_{ik} - \bar{L}_k \bar{x}_{i,k}) + \bar{x}_{i,j} \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} (V_k - \bar{L}_k) \quad (II.8)$$

y combinando (II.1), (II.7) y (II.8):

$$\sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} \left(\sum_{i=1}^C \alpha_{ij} y_{ik} + H_k - B_j \right) V_k = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} \left(\sum_{i=1}^C \alpha_{ij} \bar{x}_{ik} + \bar{h}_k - B_j \right) \bar{L}_k \quad (II.9)$$

donde α_{ij} y B_j están dadas por:

$$\alpha_{i,j} = \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial T} \frac{\partial \bar{K}_{i,j}}{\partial \bar{x}_{i,j}} \quad \bar{K}_{i,j} = \frac{\partial \bar{h}_j}{\partial \bar{x}_{i,j}} \quad (I.10.1)$$

$$B_j = \sum_{i=1}^C \alpha_{i,j} \bar{x}_{i,j} + \bar{h}_j \quad (\text{I.10.2})$$

en forma matricial (II.9):

$$\underline{\underline{G}} \underline{\underline{V}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{L}} \quad (\text{I.11})$$

que es la forma algebraica del balance de energía.